

**РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК**  
**Отделение химии и наук о материалах**  
**Институт геохимии и аналитической химии им. В. И. Вернадского**  
**Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова,**  
**химический факультет**

**3-я Всероссийская конференция**  
**"Молекулярное моделирование"**

**15-17 апреля 2003 г.**

**Москва, 2003 г.**

## **ОРГКОМИТЕТ**

### **3-й Всероссийской конференции**

### **"МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ"**

#### **Сопредседатели Оргкомитета:**

Член-корр. РАН Грибов Л.А.

Академик Зефилов Н.С.

#### **Члены Оргкомитета:**

Академик РАМН Арчаков А.И.

Проф. Баранов В.И.

Проф. Бачурин С.О.

Проф. Дементьев В.А.

Проф. Кузнецов П.Е.

Проф. Папулов Ю.Г.

Проф. Проскурлина М.В.

Проф. Эляшберг М.Е.

К.х.н. Палюлин В.А.

#### **Ученый секретарь:**

К.ф.-м.н. Жогина В.В.

## ПРОГРАММА КОНФЕРЕНЦИИ \*

15 апреля

### Утреннее заседание

**10.00** Открытие конференции

**10.10** Зефилов Н.С.

*Современные аспекты QSAR*

**11.10** Грибов Л.А.

*Молекулы как информационные приемно-преобразующие системы*

**12.10** Баранов В.И.

*Моделирование межизомерных структурных преобразований молекул. Вероятности переходов и их температурные зависимости*

**12.30** Кузьмин В.Е., Артеменко А.Г., Челомбитько В.А., Ляховский А.В., Желтвай А.И., Полищук П.Г.

*Иерархическая система моделей QSAR (1D-4D) на базе симплексного представления молекулярной структуры*

**12.50-14.00** Перерыв

### Вечернее заседание

**14.00** Беленикин М.С., Палюлин В.А., Зефилов Н.С.

*Молекулярное моделирование лиганд-рецепторных комплексов метаботропных глутаматных рецепторов*

**14.20** Дементьев В.А.

*Опыт молекулярного моделирования с использованием суперкомпьютера МВС-1000*

**14.40** Егоров В.В.

*Электродинамика протяженных многофононных переходов*

**15.00** Комиссаров Г.Г.

*Моделирование фотосинтеза*

**15.20** Молчанова М.С., Трач С.С., Зефилов Н.С.

*Направленный поиск новых типов органических реакций с помощью программы ARGENT-1: первые результаты*

**15.40** Ефремов Р.Г.

*Пептиды и белки в мембранах: анализ структуры, динамики, функции в вычислительных экспериментах*

**16.00-18.00** Стендовая секция (доклады №№ 1-35)

---

\* Время на доклады: пленарные – 40 мин + 20 мин для ответов на вопросы  
устные – 15 мин + 5 мин для ответов на вопросы

**16 апреля**

**Утреннее заседание**

- 10.00 Арчаков А.И., Иванов А.С., Дубанов А.В.**  
*Верификация молекулярного моделирования белков в качестве мишени для действия лекарств*
- 11.00 Саркисов О.М.**  
*Фемтохимия элементарных процессов*
- 12.00 Новосадов Б.К., Кочиков И.В., Тарасов Ю.И.**  
*Моделирование термически средней плотности распределения межъядерных расстояний многоатомных молекул*
- 12.20 Пиоттух-Пелецкий В.Н.**  
*Новые возможности информационной системы по ИК спектроскопии при решении спектроструктурных задач*
- 12.40-14.00 Перерыв**

**Вечернее заседание**

- 14.00 Поройков В.В.**  
*Био- и хемоинформатика белков - мишеней новых лекарств*
- 14.20 Тарасов Ю.И., Кочиков И.В., Курамшина Г.М., Новосадов Б.К., Саакян А.С.**  
*Моделирование совокупности структурных экспериментальных данных на основе параметров потенциальных функций*
- 14.40 Долгоносков А.М.**  
*Неэмпирический расчет адсорбции и предсказание удерживания в газовой хроматографии по строению молекул*
- 15.00 Эляшберг М.Е., Блинов К.А., Молодцов С.Г., Мартиросян Э.Р., Вильямс А.**  
*Установление структуры природных соединений по ограниченным 2М ЯМР данным с помощью системы STRUCTURE ELUCIDATOR (StrucEluc)*
- 15.20 Новаков И.А., Павлючко А.И., Орлинсон Б.С., Корольков В.В.**  
*Применение комплексного квантово-химического и спектроскопического метода для изучения реакционной способности аминов в конденсированном состоянии*
- 15.40 Суханов Л.П., Перевалов Д.А.**  
*Моделирование молекулярных эффектов при  $\beta$ -распаде трития неэмпирическими методами квантовой химии*
- 16.00-18.00 Стендовая секция (доклады №№ 36-70)**

**17 апреля**

**Утреннее заседание**

**10.00 Палюлин В.А., Баскин И.И., Зефирова Н.С.**

*Молекулярное моделирование и конструирование лекарств*

**11.00 Захарьев Б.Н., Чабанов В.М.**

*Послушная квантовая механика: Новый статус теории в подходе обратной задачи*

**12.00-13.00            Перерыв**

**13.00-15.00            Стендовая секция ( доклады №№ 71-105 )**

**Круглый стол**

## СТЕНДОВАЯ СЕКЦИЯ

1. **Авакянц Г.С., Комиссаров Г.Г.** Компьютерное моделирование переноса электронных возбуждений в фотосинтетической единице: вклад векторной и броуновской компонент.
2. **Алексеев Е.В.** Применения метода функционала плотности при безэталонном количественном спектральном анализе.
3. **Алифанова Е.Н., Лапина О.Ю., Субботин В.А.** Квантовохимическое исследование механизма образования и разложения анионных  $\sigma$ -аддуктов аренов в газовой фазе и растворе.
4. **Арабей С.М., Станишевский И.В., Соловьев К.Н.** Моделирование реакции фотодеструкции металлопорфиринов в полимерной матрице.
5. **Арефьева О.А., Кузнецов П.Е., Толмачев С.А., Купадзе М.С., Хлебцов Б.Н.** Молекулярная динамика и экспериментальные модели липосахарид бактерий *Azospirillum brasilense* SP245 и полисахарид-полисахаридного взаимодействия.
6. **Бабков Л.М., Ведяева Е.С., Пучковская Г.А.** Проявление конформационной подвижности и специфического межмолекулярного взаимодействия в инфракрасных спектрах триторбутилциклогексанкарбоновой кислоты.
7. **Бабков Л.М., Гнатюк И.И., Пучковская Г.А., Трухачев С.В.** Моделирование ИК спектров, строение и конформационная подвижность 4'-п-алкил-4-цианобифенилов.
8. **Бакурадзе Р.Ш., Ананишвили В.О., Джапаридзе К.Г.** Квантово-химическое моделирование некоторых электропроводящих полимеров.
9. **Беленикин М.С., Палюлин В.А., Зефирова Н.С.** Молекулярно-динамические расчеты поведения агонистов и антагонистов в лиганд-рецепторных комплексах аминоконцевых доменов метаботропных глутаматных рецепторов разных групп.
10. **Беленикин М.С., Палюлин В.А., Зефирова Н.С.** Молекулярно-динамические расчеты лиганд-рецепторных комплексов ионотропных (AMPA подтип) глутаматных рецепторов.
11. **Беленький Л.И., Суслов И.А., Чувылкин Н.Д.** Влияние стабильности окисленных состояний азота, кислорода, серы и селена на позиционную селективность производных пятичленных гетероциклов с одним гетероатомом в реакциях электрофильного замещения.
12. **Березин К.В., Татаренко О.Д., Нечаев В.В.** Расчет неплоских колебаний молекулы порфина.
13. **Берзигияров П.К., Заец В.А., Гинзбург И.Я., Разумов В.М., Шека Е.Ф.** NANOPACK и NANOVIBR: параллельные коды для полуэмпирических квантово-химических вычислений и расчетов гармонических колебаний больших систем.

14. **Богданова Т.Ф., Макаров Л.И., Пиоттух-Пелецкий В.Н.** Распознавание крупного фрагмента соединения на основе таксономии структур поискового ответа.
15. **Бондаренко Е.А., Иванов Ю.В., Вовна В.И.** Квантово-химические расчеты  $\beta$ -дикетонатных комплексов кобальта (II).
16. **Брусков В.П.** Квантово-химическое моделирование таутомерных превращений флавоно-3-олов.
17. **Бурова Т.Г., Тен Г.Н., Кучерова В.В.** Квантово-механический анализ спектров резонансного комбинационного рассеяния молекул простейших оснований нуклеиновых кислот.
18. **Буряк А.К.** Применение молекулярно-статистических расчетов для моделирования внутримолекулярных превращений адсорбированных молекул.
19. **Васильев П.М., Горлов И.Ф., Юрина О.С.** Прогноз фармакологической активности многокомпонентных смесей органических соединений в информационной технологии "Микрокосм".
20. **Васильев Р.Ф.** Моделирование термолитиза пероксидов и возбуждения хемилюминесценции продуктов полуэмпирическими методами квантовой химии. Локальные минимумы, случайные ошибки, способы их уменьшения.
21. **Виноградова М.Г., Папулов Р.Ю., Михайлова Ю.А., Нилов Д.Ю.** Перечисление изомеров замещения спиропентана.
22. **Гаспилович Е.А., Королькова Н.В., Клименко В.Г., Серов С.А., Нурмухаметов Р.Н.** Влияние спин-орбитальной связи в атомах гетероциклических аналогов флуорена на дипольные моменты перехода  $T^1 \rightarrow S_0$ .
23. **Гафуров У.** Молекулярная модель ползучести высокоориентированных линейных кристаллических полимеров.
24. **Гришина М.А., Потемкин В.А., Русинов Г.Л., Слепухин П.А.** Теоретическое исследование реакций нуклеофильного замещения солей 1-алкил-2-морфолил-3-хлорпипразина С-нуклеофилами в присутствии оснований.
25. **Гугава М.Т., Павленишвили И.Я., Джапаридзе К.Г.** Моделирование синтеза спирохроменов на основе некоторых аналогов оснований Фишера.
26. **Гучик И.В., Фролов Ю.Л., Шагун В.А., Трофимов Б.А.** Квантовохимический анализ механизмов образования сверхосновных сред типа "гидроксид щелочного металла-вода-диметилсульфоксид" (МОН-Н<sub>2</sub>O-DMCO), где М=Li, Na, K.
27. **Дмитриев А.В., Барышников В.Г.** О движении ионов в порообразующих белковых молекулах.
28. **Дмитрук А.Ф., Заречная О.М., Опейда И.А.** Природа переходного состояния реакции рекомбинации пероксильных радикалов.

29. **Емелина Т.Б., Щека О.Л.** Использование квантовохимического метода  $X_\alpha$  – ДВ для изучения электронного строения и химических свойств платиновых катализаторов.
30. **Желтвай А.И., Кузьмин В.Е., Челомбитько В.А., Алиханиди С.Э., Ляховский А.В.** Стереохимический анализ хиральных ароматических полиэдров.
31. **Житов А.Н., Лебедев М.В., Супрун И.П., Иванов С.Г.** Исследование возможностей генетического алгоритма для решения задачи многокомпонентного анализа газовых смесей по дистанционным ИК спектрам поглощения атмосферы.
32. **Завалий М.В.** Моделирование динамических вибронных спектров сложных молекул с учетом межизомерных переходов.
33. **Зволинский В.П., Годик В.А.** Квантовохимическое моделирование спектрально-люминесцентных и генерационных характеристик молекулы 2,2'-битиенил-1,3,4-оксадиазола в растворителях различной природы.
34. **Иванова А.А., Иванов А.А., Олиференко А.А., Палюлин В.А., Зефирова Н.С.** Построение универсальной QSPR-модели для разнородной выборки органических соединений.
35. **Иванов А.А., Баскин И.И., Палюлин В.А., Зефирова Н.С.** Сравнительный анализ структуры аденозиновых рецепторов и механизмов связывания их лигандов.
36. **Иванов А.А., Кочиков И.В., Новосадов Б.К., Рыков А.Н., Степанова А.В., Тарасов Ю.И.** Моделирование интенсивности рассеяния электронов на струе пара молекул с движением большой амплитуды.
37. **Иванов Ю.В., Вовна В.И.** Неэмпирические квантовохимические расчеты спектров фотоионизации дикетонатных комплексов Ni.
38. **Калниньш К.К., Семенов С.Г.** Синглетные  $S_1$  и триплетные  $T_1$  бирадикальные состояния этилена и его производных.
39. **Кацюба С.А., Вандюкова Е.Е.** Квантово-химическое моделирование колебательных спектров как метод исследования структуры молекул.
40. **Киреев А.Ф., Каюков А.П.** Обоснование подхода к теоретическому расчету масс-спектра  $\beta, \beta'$ -дихлоридэтилсульфида на основе квантово-химического полуэмпирического метода PM-3 и расчетного ИК-спектра.
41. **Королевич М.В., Жбанков Р.Г., Пиоттух-Пелецкий В.Н., Дерендяев Б.Г.** Моделирование ИК спектров углеводов.
42. **Косарев А.В., Мельников Г.В.** Функция распределения молекул спирта в мицеллярных ассоциатах.
43. **Кузнецова Н.Б., Кузнецов П.Е., Согуренко И.А.** Дибензо-пара-диоксины – катализаторы образования перекиси водорода.
44. **Кузнецов П.Е.** Дескрипторы микроокружения в задачах QSAR.



45. **Кузьмин В.Е., Огниченко Л.Н., Артеменко А.Г., Ляховский А.В.** Прикладные возможности концепции информационного поля молекулы.
46. **Кунцевич А.Д., Писковский С.В., Новиков С.С., Матюшин Ю.Н., Селезнев П.А., Вьюнова И.Б.** О классификации химических соединений, необходимой при разработке базы данных для внеэкспериментального прогноза зависимости биологической активности от структуры химического соединения.
47. **Лагунин А.А.** Количественный анализ зависимостей структура-спектр активности-величина эффекта для ингибиторов эндотелин-превращающего фермента с применением самосогласованной регрессии.
48. **Лебедев К.С., Строков И.И.** Моделирование процессов фрагментации органических молекул под действием ионизирующего излучения.
49. **Лобанов А.В., Комиссаров Г.Г., Холуйская С.Н.** О роли  $\text{H}_2\text{O}_2$  в экспериментах, моделирующих абиогенный синтез органических веществ.
50. **Мелихов Н.А., Шмелев Р.В., Дмитриев А.В., Барышников В.Г.** О распределении молекулярного электростатического потенциала в полости порообразующих белков.
51. **Мельников Г.В., Косарев А.В.** Моделирование триплет-триплетного переноса энергии электронного возбуждения в водно-мицеллярных растворах.
52. **Морозова Т.А., Крылов А.В., Белов А.П.** Структурная нежесткость  $\eta^3$ -аллильного комплекса палладия на основе сорбиновой кислоты.
53. **Морозов В.А., Дубина Ю.М.** Смешанное квантово-классическое моделирование внутримолекулярной динамики при преобразовании света молекулами.
54. **Муравьев Г.А.** Взаимодействие двух атомов на расстояниях, сравнимых с их размерами.
55. **Муратов Е.Н., Кузьмин В.Е., Камалов Г.Л., Котляр С.А., Григоращ Р.Я., Шишкин О.В., Шишкина С.В.** Модели для анализа структурного подобия конформаций макроциклов.
56. **Муштакова С.П., Варламова Т.М., Герасимова Г.В., Юрина Е.С.** Квантово-химическое моделирование строения комплексов щелочных металлов с апротонными растворителями.
57. **Новиков С.С., Писковский С.В., Лебедев В.П., Селезнев В.А.** Оценка термодинамических и кинетических параметров при расчетном моделировании активных центров ферментов и рецепторов некоторых физиологически активных соединений.
58. **Новосадов Б.К.** Использование интегрального уравнения для теории возмущений при моделировании ангармонических колебательных спектров молекул.
59. **Новосадов Б.К., Кочкиков И.В., Тарасов Ю.И.** Моделирование ангармонических силовых констант многоатомных молекул методом масштабирования результатов неэмпирических расчетов.

60. **Осипов А.Ю., Иванов Ю.В., Вовна В.И.** Расчет фотоионизационных спектров фторированных производных ацетилацетоната Cu и Ni.
61. **Павич Т.А., Арабей С.М.** Моделирование фотохимических превращений бисантена и его фенилпроизводных.
62. **Панюшкин В.Т., Сухно И.В., Бузько В.Ю., Ковалева И.А.** Моделирование магнитно-релаксационных свойств и состояния акваиона Ga(3+) в водных растворах электролитов.
63. **Папулов Ю.Г., Виноградова М.Г., Басалаева П.С.** Комбинаторный анализ в химии.
64. **Погребняк А.В.** MATRIX - новый алгоритм прогнозирования биологического действия органических молекул, основанный на многомерном анализе физико-химических дескрипторов современных лекарственных препаратов.
65. **Потемкин В.А., Гришина М.А., Гуччионе С., Перспикаче С.** Определение ориентации ДНК антиметаболитов в полости реального рецептора в рамках 3D QSAR метода BiS.
66. **Рогачева С.М., Кузнецов П.Е., Злобин В.А., Назаров Г.В., Грачева А.А., Согуренко И.А.** К вопросу о физической природе действия сверхнизких концентраций – эксперимент и теория.
67. **Рыбальченко И.В., Павлючко А.И., Сигейкин Г.И., Киреев А.Ф., Суворкин В.Н.** Квантово-химическое моделирование ИК-спектров фосфорорганических соединений с точностью, необходимой для их спектральной идентификации
68. **Рыжов А.Н., Лapidус А.Л., Словохотова О.Л., Смоленский Е.А., Чуваева И.В., Зефиоров Н.С.** Расчеты топографических индексов Винера для алканов.
69. **Рыжов А.Н., Маслова Л.К., Смоленский Е.А., Лapidус А.Л., Зефиоров Н.С.** Моделирование температур плавления нормальных алканов.
70. **Рябченко О.Б., Слабженников С.Н., Куартон Л.А.** Исследование характеристик связи металл-лиганд в трис-ацетилацетонатных комплексах переходных металлов и металлов III-A группы методами ИК-спектроскопии и квантовой химии.
71. **Садым А.В., Лагунин А.А., Филимонов Д.А., Поройков В.В.** Интернет-ресурс для прогноза спектра биологической активности ХС.
72. **Салтыкова М.Н., Виноградова М.Г., Чернолецкий К.В., Смоляков В.М.** Моделирование свойств замещенных метилсилана в атом-атомном представлении.
73. **Сальников А.Н., Спивак А.В., Мельников Г.В.** Кинетика процессов дезактивации энергии электронного возбуждения молекул пирена, иммобилизованных в полисахаридные матрицы.
74. **Скворцова М.И., Федяев К.С., Палюлин В.А., Зефиоров Н.С.** Базисные топологические дескрипторы и их применение для построения корреляций "структура-свойство".

75. **Скворцова М.И., Федяев К.С., Палюлин В.А., Зефирова Н.С.** Обратная задача в проблеме связи "структура-свойство" для случая корреляционных уравнений, содержащих базисные топологические дескрипторы.
76. **Смоленский Е.А., Камерницкий А.В., Маслова Л.К., Зефирова Н.С.** Применение дескрипторного анализа для моделирования влияния минералокортикоидов на  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ -зависимую АТФ-азу.
77. **Смоленский Е.А., Шпилькин С.А., Чуваева И.В., Чувылкин Н.Д.** Моделирование геометрических корреляционных эффектов ступенчатыми функциями.
78. **Солкан В.Н., Кузьмин И.В.** Исследование методом функционала плотности присоединения трет-бутильного катиона к изобутену, 1-бутену и 2-бутену в среде жидкой  $\text{HF}$ .
79. **Соловова Н.В., Курбатова С.В.** Компьютерная система прогнозирования "структура-свойство".
80. **Соловьев А.Н., Баранов В.И.** Моделирование возбужденных состояний и вибронных спектров аценов.
81. **Сударушкин С.К.** Моделирование действия аналитических реагентов с полиэлементным детектированием
82. **Сударушкин С.К., Гусакова Н.Н.** Молекулярное моделирование для оценки ароматических альдегидов как органических реагентов на первичные ароматические амины.
83. **Сухно И.В., Бузько В.Ю., Панюшкин В.Т., Арутюнян М.М.** Учет влияния фоновых электролитов на константы устойчивости комплексных соединений при моделировании гидрохимических процессов.
84. **Тен Г.Н., Бурова Т.Г., Баранов В.И.** Моделирование структуры пурина в различных фазовых состояниях.
85. **Тимофеева З.Ю., Егорова А.Ю.** Моделирование реакционной способности 3Н-пиррол-2-онов и 3Н-фуран-2-онов в условиях конденсации Михаэля.
86. **Ткаченко О.Ю., Белов А.П.** Компьютерное моделирование внутрисферных превращений в  $\eta^3$ -аллильных комплексах палладия с аминами.
87. **Трач С.С., Молчанова М.С., Зефирова Н.С.** Реализация дискретной контрамоции в алгоритмах генерации органических структур и реакций.
88. **Трач С.С., Молчанова М.С., Зефирова Н.С.** О регулярности вырожденных процессов: классификация вырождения и ее применение для целей систематического поиска новых типов органических реакций.
89. **Тупицын Е.Н., Березин К.В., Березин В.И.** Квантовые модели и спектральные свойства монозамещенных бензола.
90. **Туровский Н.А., Опейда И.А., Николаевский А.Н., Антоновский В.Л.** Супрамолекулярная модель реакции каталитического распада органических пероксидов, активированного ониевыми солями.

91. **Филимонов Д.А.** Компьютерная оценка свойств химических соединений с использованием неполной эмпирической информации.
92. **Фоменко А.Е., Соболев Б.А., Филимонов Д.А., Поройков В.В.** Применение структурных MNA-дескрипторов для поиска сходства аминокислотных последовательностей белков.
93. **Фролов Ю.Л., Гучик И.В.** Квантовохимическое исследование внутримолекулярного вращения метилтиогруппы в молекуле тиоанизола.
94. **Фурер В.Л., Коваленко В.И., Борисоглебская Е.И.** Расчет интенсивностей полос в ИК спектрах и конформационный анализ каликс[4]аренов.
95. **Хромов А.И., Артеменко А.Г., Кузьмин В.Е.** Специализированная СУБД для решения задач 1D-4D QSAR/QSRP.
96. **Чистяков А.Л., Станкевич И.В.** О проблеме стабилизации  $\eta^5$ -связей в комплексах фуллерена  $C_{60}$  с атомами переходных металлов. Моделирование методом DFT-PBE структуры и электронного строения комплексов  $12\eta^5 - \pi - MC_5H_5C_{60}$  (M=Fe, Ru, Os).
97. **Чистяков А.Л., Станкевич И.В., Гамбарян Н.П., Ахрем И.С.** Изучение активации метана и пропана методом DFT.
98. **Шамсиев Р.С., Белов А.П.** Квантово-химическое моделирование путей образования пи-комплексов этилена с тетрахлооропалладатом (2-).
99. **Шамсиев Р.С., Белов А.П.** Взаимодействие аллилхлорида с тетракарбонилами никеля и палладия (квантово-химическое моделирование).
100. **Шека Е.Ф.** Являются ли фуллерены полирадикалами?
101. **Шека Е.Ф., Заец В.А., Каманина Н.В.** О виртуальном и реальном переносе заряда в межмолекулярных комплексах на основе фуллеренов.
102. **Элькин М.Д., Ведяева С.Ю., Элькин П.М.** Теоретическое исследование колебательных спектров и электронной структуры полихлорированных дибензо-п-диоксинов.
103. **Элькин М.Д., Ведяева С.Ю., Успенский К.Е.** Моделирование колебательных спектров  $\beta$ -хлорвинилдихлорарсина (люизита).
104. **Юхневич Г.В., Тараканова Е.Г., Цой О.Ю.** Перенос протона в системе ДМФА-HCl кислота по данным ab initio расчетов.
105. **Яковенко О.Я., Голуб А.Г., Бджола В.Г., Ярмолюк С.М.** Интеграция молекулярной динамики и докинга для предсказания биологической активности химических соединений.